有限要素法の構成的誤差評価とその計算機援用証明への応用 (現象解明に向けた数値解析学の新展開 II)

AUTHOR(S):

中尾, 充宏

CITATION:

中尾, 充宏. 有限要素法の構成的誤差評価とその計算機援用証明への応用 (現象解明に向けた数値解析学の新展開 II). 数理解析研究所講究録 2017, 2037: 54-56

ISSUE DATE:

2017-07

URL:

http://hdl.handle.net/2433/236857

数理解析研究所講究録
第2037巻 2017年 54-56

有限要素法の構成的誤差評価とその計算機援用証明への応用

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所　中尾　充宏

Mitsuhiro T. Nakao
Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

偏微分方程式 (PDE) の解に対する精度保証付き数値計算 (解の数値的存在検証) では、簡単な PDE の有限要素解に対する構成的 a priori 誤差評価が、その出発点であり、本質的な役割を果たす。ここでは、著者らがこれまで提案・研究してきた精度保証の原理を簡単に紹介し、定常 Navier-Stokes 方程式を含む楕円型問題と、その発展系としての放物型初期境界値問題について、構成的誤差評価の現状を述べ、今後の動向を探る。

1 楕円型方程式

次の 2 階非線形楕円型境界値問題の解に対する数値的検証について考える。詳しくは [3],[7] などを参照。

$$\begin{cases} -\Delta u &= f(x,u,\nabla u), \quad x\in\Omega, \\ u &= 0 \quad x\in\partial\Omega, \end{cases} \tag{1}$$

ここに Ω は R^n $(1\le n\le 3)$ の有界領域、 f は $H_0^1(\Omega)(\equiv H_0^1)$ から $L^2(\Omega)$ への有界連続写像 (即ち、$H_0^1(\Omega)$ の有界集合を $L^2(\Omega)$ の有界集合に写す) とする。

(1) を有限次元で扱うためにメッシュサイズ h の有限要素空間 $S_h\in H_0^1$ を用意し、 $L^2(\Omega)$ 上の内積を $(\cdot,\cdot)$ と表すとき、$\phi\in H_0^1$ に対する H_0^1-projection: $P_h\phi\in S_h$ を次式で定義する。

$$(\nabla\phi-\nabla(P_h\phi),\nabla v_h)=0, \quad \forall v_h\in S_h. \tag{2}$$

このとき、 $\Delta\phi\in L^2(\Omega)$ ならば一般に次の形の誤差評価が成り立つ。

$$\|(I-P_h)\phi\|_{H_0^1}\le C(h)\|\Delta\phi\|_{L^2}. \tag{3}$$

ここに I は H_0^1 上の恒等作用素であり、 $C(h)$ は $h\to 0$ のとき、 $C(h)\to 0$ となるような正定数を意味し、その上界が数値的に決定できるものとする。評価式 (3) は、無限次元問題を有限次元問題として扱うために本質的な役割を果たす。即ち連続と離散の間をつなぐ架け橋となるものである。なお、Navier-Stokes 方程式の場合には、$H_0^1-projection$ が、$Stokes-projection$ となることも予想できよう。

いま、各 $\psi\in L^2(\Omega)$ に対し、$\phi\in H_0^1$ を斉次境界条件の Poisson 方程式 : $-\Delta\phi=\psi$ の解とし、$\phi\equiv(-\Delta)^{-1}\psi$ と表し、$F\equiv(-\Delta)^{-1}f$ と定義すれば、 f の条件から F は H_0^1 上のコンパクト作用素となり、(1) は不動点形式 : $u=F(u)$ に表すことができる。
このとき不動点方程式 $u=F(u)$ に対する次の分解は、問題を計算機上の有限操作に帰着させるための基本原理を与える。

$$\begin{cases} P_hu &= P_hF(u) \\ (I-P_h)u &= (I-P_h)F(u) \end{cases} \tag{4}$$

即ち、(4) で、その前半は有限要素空間 S_h における方程式であり、後半はその誤差の属する無限次元空間 $S_h^{\perp}$ (H_0^1 における S_h の直交補空間) における方程式と見なすことができる。

逐次反復にもとづく精度保証　(4) を満たす u を含む集合 $U \subset H_0^1$ は、解の**候補者集合** (candidate set) と呼ばれる。通常 U は、$U_h \subset S_h$ と $U_\perp \subset S_h^\perp$ に対して $U = U_h \oplus U_\perp$ の形で構成される。このとき、Schauder の定理にもとづく解の検証条件は、次の形で与えられる。

$$\begin{cases} P_h F(U) & \subset \quad U_h \\ (I-P_h)F(U) & \subset \quad U_\perp \end{cases} \tag{5}$$

ここで、U_h は一般に S_h の基底関数の区間を係数とする 1 次結合で表現され、$U_\perp$ は $S_h^\perp$ における原点中心の半径 $\alpha \geq 0$ の球として表される。
候補者集合 U に対して、$P_h F(U)$ は、区間ベクトルを右辺とする連立一次方程式を、区間演算を用いて解くことによって直接計算される。一方、$(I-P_h)F(U)$ は構成的 a priori 誤差評価 (3) を用いて、次のように算定 (一般に over-estimates) される。

$$||(I-P_h)F(U)||_{H_0^1} \leq C(h) \sup_{u \in U} ||f(u)||_{L^2}. \tag{6}$$

このとき (5) の前半の条件は、両辺の対応する係数区間の包含関係として、後半は球の半径に対応する 2 つの非負実数の大小関係によって検証される。

有限次元 Newton 法　逐次反復にもとづく検証条件 (5) が成り立つためには、作用素 F がその不動点の近傍で引き込み的 (retractive) であることが必要条件である。したがって、より一般な問題に適用するためには、何らかの Newton-like な手法を考慮せねばならない。ここでは、近似解 $\widehat{u}_h$ を用いた Newton 型作用素 N_h を次のように定める。

$$N_h(u) := P_h u - [P_h - P_h A'(\widehat{u}_h)]_h^{-1}(P_h u - P_h F(u)),$$

ここに $A'(\widehat{u}_h) \equiv (-\Delta)^{-1} f'(\widehat{u}_h)$ で $f'(\widehat{u}_h)$ は、f の $\widehat{u}_h$ における Fréchet 微分である。なお、S_h 上の作用素 $[P_h - P_h A'(\widehat{u}_h)]_h^{-1}$ は、作用素 $(P_h - P_h A'(\widehat{u}_h))$ の S_h への制限に対する逆作用素を意味する。そのような (有限次元) 逆作用素の存在は、行列の可逆性と同値であり、通常の精度保証付き数値計算によって立証できることに注意。さらに、

$$T(u) \quad := \quad N_h(u) + (I-P_h)F(u). \tag{7}$$

とおけば、T は (4) の前半に対する Newton-like 作用素と、後半に対する逐次反復作用素の和であり、$u = T(u)$ は $u = F(u)$ と同値であることが示され、検証条件も同じ形で与えられる。なお、(7) の前半は、有限次元 Newton 法の効果により、また後半は、h が十分小さければ誤差評価 (6) の効用によって、いずれも縮小性 (contractiveness) が期待できることに注意。

無限次元 Newton 法　もともとの問題 (1) に無限次元のままで Newton-like 手法を適用する場合には、その線形化作用素に対する逆作用素評価が本質的となる。一般に、(1) の線形化問題は斉次境界条件を満たす次の形の楕円型方程式となる。

$$\mathscr{L}u := -\Delta u + b \cdot \nabla u + cu = \psi, \tag{8}$$

この場合にも、誤差評価 (3) が基本的に重要な役割を果たす。いま、$b \in W_1^\infty(\Omega)^n$, $c \in L^\infty(\Omega)$, $\psi \in L^2(\Omega)$ とし、ρ を逆作用素 $\mathscr{L}^{-1}$ に対する近似ノルムとする。このとき、定数を次のように定める。
$C_{\mathrm{div}\, b} := \|\mathrm{div}\, b\|_{L^\infty(\Omega)}$, $C_b := \left(\sum_{i=1}^n \|b_i\|_{L^\infty(\Omega)}^2\right)^{1/2}$, $C_c := \|c\|_{L^\infty(\Omega)}$, $C_1 := C_p C_{\mathrm{div}\, b} + C_b$, $C_2 := C_p C_c$, $C_3 := C_b + C_p C_c$, $C_4 := C_b + C(h) C_c$。ここに C_p は Ω 上の Poincaré 定数。

このとき次の定理は基本的である。

定理 1. ([2]) 次式が成り立つとき (8) で定義された作用素 $\mathscr{L}$ は可逆である。

$$\kappa \equiv C(h)\big(\rho C_3(C_1+C_2)C(h)+C_4\big) < 1, \tag{9}$$

ここに、$C(h)$ は (3) にけると同じ誤差評価定数である。

この定理を適用することによって、逆作用素ノルム $\|\mathscr{L}^{-1}\|$ も評価でき、非線形問題 (1) に対して無限次元 Newton 法による解の検証手順を与えることができる。

2 放物型方程式

前節に述べた解の検証原理は、次の放物型方程式の初期値境界値問題にも拡張できる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f(x,t,u), \qquad (x,t) \in \Omega \times J \tag{10}$$

ここに Ω は前と同様で $J=(0,T)$ $(T>0)$ とし、初期条件および境界条件はいずれも斉次とする。いま、$g \in L^2(\Omega\times J)$ に対して、次の簡単な線形熱方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \Delta \phi = g \qquad (x,t) \in \Omega \times J \tag{11}$$

の解 ϕ を、$\phi = (\Delta_t)^{-1}g$ と表し、$F(u) \equiv (\Delta_t)^{-1}f(u)$ とおけば、方程式 (10) は、時間依存型 Sobolev 空間 $L^2(J;H_0^1(\Omega))$ 上のコンパクト作用素 F の不動点の形に書ける。この場合も、(11) の解 ϕ に対する近似解の構成的 a priori 誤差評価が得られれば、前節の検証法が適用できる。[5] では、空間方向の半離散近似解に対応する定数係数常微分方程式系の基本解行列を厳密に表現し、時間方向 Lagrange 補間を用いた全離散近似：$P_h^k\phi$ を定義し、次の構成的 a priori 誤差評価を与えている。

$$\left\|\phi - P_h^k\phi\right\|_{L^2\left(J;H_0^1(\Omega)\right)} \le C(h,k)\,\|g\|_{L^2\left(J;L^2(\Omega)\right)}, \tag{12}$$

ここに h および k はそれぞれ空間および時間方向のメッシュサイズを意味する。[1] では、非線形問題に対する prototype な検証例を得ており、今後、実際的問題への適用が期待される。

実際の有限要素空間における $C(h)$ および $C(h,k)$ の具体例と、これまでに実現した検証例については、[4], [5], [6] などを参照されたい。

参考文献

[1] T. Kinoshita, T. Kimura, M. T. Nakao, On the a posteriori estimates for inverse operators of linear parabolic equations with applications to the numerical enclosure of solutions for nonlinear problems, Numerische Mathematik, 126 (2014), 679-701.

[2] Nakao, M.T., Hashimoto, K. & Watanabe, Y., A numerical method to verify the invertibility of linear elliptic operators with applications to nonlinear problems, Computing 75 (2005), 1-14.

[3] M. T. Nakao, Y. Watanabe, Numerical Verification Methods for Solutions of Semilinear Elliptic Boundary Value Problems, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 2 (2011), 2-31.(access free by Website)

[4] 中尾充宏・渡部善隆, 実例で学ぶ精度保証付き数値計算—理論と実装—, サイエンス社, 2011.

[5] M. T. Nakao, T. Kimura, T. Kinoshita, Constructive a priori error estimates for a full discrete approximation of the heat equation, SIAM Journal on Numerial Analysis, 51 (2013), 1525-1541.

[6] 中尾充宏、偏微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算、数学、**65** (2013), 113-132.

[7] Y. Watanabe, M. T. Nakao, Numerical verification method of solutions for elliptic equations and its application to the Rayleigh-Bénard problem, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26 (2009), 443-463.